

Os rizomas de *Ipomoea batatas* (L.) são usados atualmente como fonte de alimento, bem como na medicina popular. O gênero *Ipomoea* representa uma rica fonte de glicosídeos, que nas *Ipomoea batatas* demonstraram ser encontrado principalmente em suas raízes. Recentemente, nas partes aéreas dessa espécie foram realizados estudos químicos, descrevendo que as partes aéreas da *I. batatas* são capazes de produzir quatro novos glicosídeos, chamados de Ipomatosídeos A, B, C, e D. Os glicosídeos são conhecidos por apresentar várias atividades biológicas bem como, citotóxico para células cancerígenas, antimicrobiano, antifúngico, antituberculoso e antidepressivo. Todavia, nesses quatro novos glicosídeos observou-se a presença de atividade anti-inflamatória, não descrita anteriormente para essa classe, modulando tanto a enzima COX-1 quanto COX-2. A elucidação estrutural desses quatro Ipomatosídeos, como etapa para futuros estudos, apresenta dificuldades devido a alta flexibilidade desses compostos. Nesse contexto, o presente trabalho tem como objetivo obter a caracterização conformacional dos Ipomatosídeos A, B, C, e D em solvente de piridina e solvente aquoso. Após realizar a caracterização estrutural dessas moléculas, essas serão empregadas em estudos de docking em ambas enzimas COX, com o intuito de oferecer novas abordagens para estudos dos Ipomatosídeos como potenciais agentes anti-inflamatórios. O protocolo utilizado inclui, construção de mapas através de simulações por metadinâmica para cada dissacarídeo que compõe os Ipomatosídeos e simulações de dinâmica molecular empregando o pacote de programas GROMACS e o campo de força GROMOS96 43a1. Os compostos foram construídos baseados nas conformações mais estáveis das unidades dissacarídicas em solução, obtidos a partir das simulações de metadinâmica. Os estudos de docking foram realizados através da utilização dos programas Autogrid e Autodock. Os dados obtidos até o presente momento demonstram que a distância presente nos modelos estruturais caracterizados em piridina e água estão de acordo com os dados prévios de ROESY, possibilitando assim um estudo conformacional preciso destas moléculas em solução. Os dados prévios dos estudos de docking sugerem a ligação dos Ipomatosídeos no sítio peroxidase em ambas as enzimas COX.